

ArNe

$(ArNe)_2$

$ArNe^+$

Ne Ar⁺

14Б50. Масс-спектрометрическое обнаружение молекулярного иона NeAr⁺. Fuchs R., Kaul W. Massenspektrometrischer Nachweis des Moleküliöns (NeA)⁺. «Z. Naturforsch.», 1960, 15a, № 2, 108—115 (нем.).—Произведено масс-спектрометрич. исследование ионов, образующихся в ионном источнике, содержащем в ионизационной камере смесь Ne и Ar. Обнаружены ионы Ne⁺, Ar⁺, NeAr⁺ и Ar⁺₂. Измерения потенциалов появления этих ионов дали соответственно следующие значения (в эв): 21,2; 15,1; 16,5 и 14,7. Измерения выхода ионов NeAr⁺ и Ar⁺₂ от давления показали, что эти ионы образуются во вторичных процессах. Ионы NeAr⁺ образуются, по-видимому, в процессах Ne + e⁻ + E(кин.) → Ne* + e⁻ и Ne* + Ar → NeAr⁺ + e⁻, причем энергия возбуждения Ne* равна измеренному потенциалу появления NeAr⁺. Оценено сечение образования иона NeAr⁺: $\sigma \approx 0,6 \cdot 10^{-16} \text{ см}^2$, если время жизни возбужденного состояния Ne* $\sigma(\text{Ne}^*) \geq 10^{-4} \text{ сек.}$, и $\sigma \approx 9 \cdot 10^{-14} \text{ см}^2$, если $\sigma(\text{Ne}^*) \approx 10^{-8} \text{ сек.}$ Ионы Ar⁺₂ образуются в процессе, аналогичном предыдущему; Ar* + Ar → Ar⁺₂ + e⁻. Для этих ионов, $\sigma \cdot \tau(\text{Ar}^*) = 1,8 \cdot 10^{-21} \text{ см}^2 \text{ сек.}$ При напуске в ионизационную камеру смеси Ar—Kr обнаружены ионы ArKr⁺, однако процесс их образования не установлен.

Е. Франкевич

1960

1375

I-

ж. 1961.14

He Ar⁺, Ar Xe⁺ 1962
Ne Xe⁺, Ar Ne⁺, He Ne⁺ (A.P.) XI 2062

Munson M. S. B., Franklin J. L.,
Field F. H.,

J. Phys. Chem., 1963, 67, N7,
1542-48.

a mass spectrometric study of
homonuclear and heteronuclear
rare gas molecule ions

6764

10

Ex 75 001111

Ne Ar

Matcha R. L.,
Nesbet R. K.

1967

Phys. Rev., 160, n 1, 72-5

Измерение дипольных
моментов двухатомных
молекул итереймат га-
зов.

(из III Me Ne)

I968

NeAr

Nesbet R.K.

J. Chem. Phys., 48, 1419

Interatomic potentials for HeNe,
HeAr, NeAr.

(Cu. He Ne) III

Ne Ar

кратны,
со-чине

Konowalow D.D. 1969

J. Chem. Phys.,
50, N1, 12-16

(Cu. He Ne) III

Ar-Ne

1974

Ar-Kr

Kr-Xe

MECAT.
NOTEN;

СЛЕДСТ

179468f Interatomic potentials and phonon spectra of dilute rare gas mixtures. Cohen, Simon S.; Klein, Michael L. (Div. Chem., Natl. Res. Council Canada, Ottawa, Ont.). *J. Chem. Phys.* 1974, 61(8), 3210-16 (Eng). Existing theor. results for the impurity induced ir absorption in dil. alloys were applied to study the following rare-gas mixts.: Ar-Ne, Ar-Kr, ~~Kr-Ar~~, and Kr-Xe. The theory takes into account both mass and force-const. changes, within the harmonic approxn. In evaluating the latter, attempts were made to use realistic pair potentials. A resonance mode was identified for an Ar crystal doped with Ne, and a localized mode in Kr doped with Xe. The predicted resonance mode agrees well with the obsd. spectrum of Keeler and Batchelder. The model for Kr doped with Xe gives rise to a localized mode which happens to fall very close to the band edge. Any attempt to shift this mode far from the band edge would

C.A. 1974. 81 n 26

(42)



require an unreasonably large change in the force const. around the Xe site. Within the framework of the model and the assumption of randomly distributed impurity atoms, it is difficult to support the observation of this mode claimed by Obriot et al. However, once allowance is made for the exptl. resoln., their recorded spectra for both Kr-Ar and Kr-Xe agree fairly well with the theor. predictions. On comparing the results for the absorption of the Ar-Kr system, with the expts. of Keeler and Bachelder, it was necessary to allow for the finite lifetime of pure-lattice phonons even at low temps. Such an effect appears to have a profound influence on the relative intensities in different regions of the absorption band. This effect does not appear to have been discussed previously in the literature.

№ 174⁺

1974.

Ефременкова Л. Л.
и др.

наращивает. Оптика и спектры.
Взрыв. 1974, 36 (1), 61-68

(сери. Li-ионит; III)

Ne Ar

*B-6427

1974.

Kim Yung Sik, Gardon R G.

nommes. "J. Chem. Phys"

написан.

1974, 61 N1, # 1-16

1974

Ne Ar

Ne Kr

Ne Xe

nomencl.
sp-ys

47836k Improved potentials for neon + argon, neon + krypton, and neon + xenon. Ng, C. Y.; Lee, Y. T.; Barker, J. A. (James Franck Inst., Univ. Chicago, Chicago, Ill.). J. Chem. Phys. 1974, 61(5), 1996-2003 (Eng). Improved interat. potentials for Ne-rare gas pairs were obtained by fitting a multiparameter potential to low energy differential cross sections, 2nd virial coeffs., and diffusion coeffs. All asymmetric Ne-rare gas potentials have narrower attractive wells than those of the symmetric rare gas pairs. The values of the potential parameters r_m and ϵ for Ne + Ar, Ne + Kr, and Ne + Xe are 3.43 Å, 71.9° K; 3.58 Å, 74.5° K, 3.75 Å 75.0° K, respectively.

C.A. 1975 82 N8

50923.3725
Ph, Ch, TC, MGW

96965

Ne - Ar

1975

* 4-9755

Dham_K., Gupta S.C. Force constants
for unlike molecules. "Phys. Lett.",
1975, A53, N 6, 485-487

(англ.)

0450 пик

436 438

4 4 2

ВИНИТИ

60102.3310
Ch, Ph, TC

40392

Нефт (исл. мех. части)

1975

ХЗ-10290

Hathaway Kristil B., Krumhansl James A.

Extended Hückel calculation of repulsive interactions in noble gases.

"J.Chem. Phys.", 1975, 63, N 10, 4303-4312

(англ.)

0533 ББК

504 507

ВИНИТИ

50909.1905

TC, Ch, Ph

Ne-Ar_{30526GR}

1975

3267

Murrell J.N., Varandas A.J.C. Perturbati-
on calculations of rare-gas potentials
near the van der Waals minimum.

"Mol. Phys.", 1975, 30, N 1, 223-236

(англ.)

0445 гик

418 419

0437

ВИНИТИ

50627.2434

Ch, Ph, TC, MGU

40892

Ne-Ar

1975

4154

Tanaka Y., Yoshino K., Freeman D.E.

Emission spectra of heteronuclear
diatomic rare gas positive ions.

"J. Chem. Phys.", 1975, 62, N 11, 4484-
4496

(англ.) 0396 пик

370 374

ВИНИТИ

60423.1218

Ch, Ph, TC, MGU

Ar-Ne
40892

(μ)

1976

4221

Bar-Ziv Ezra, Weiss Shmuel.

Uniform reduced interaction dipole
for all rare gas pairs. "J.Chem.Phys.",
1976, 64, N6, 2417-2420 (англ.)

0610 ПАК

582 583

511

ВИНИТИ

60423.1211

Ch, Ph, TC

Ar-Ne

40892

1976

~~Ar~~

Ar-He

*5-12642

Bobetic M.V., Barker J.A. Vibrational levels of heteronuclear rare gas van der Waals molecules. "J. Chem. Phys.", 1976, 64, N6, 2367-2369 (англ.)

0610 мм

582 583

602.

ВИНИТИ

70325.6630

Ch, Ph, TC

96200

Ne Ar

1977

K 5-17503

Ahlrichs R., Penco R., Scoles G.

Intermolecular forces in simple systems.

"Chem. Phys.", 1977, 19, N 2, 119-130

(англ.)

0839 нмк

805 809 830

ВИНИТИ

NEAr Maitland E.C., Wakeham W.A. 1978

mol. Phys., 1978, 35(5), 1443-69

nomens,
pruse

(cur. Kr Xe) III

NeAr | ammonia 8332 | 1979
Goble J. H., et al.

(90) J. Chem. Phys., 1979, 70(5)
2058-62

Ne-Ar ommeu 8624 1979

Waldman M., et al.
nomeres.

Взаимог. J. Chem. Phys., 1979,

41 (3), 1325-39

№ Ар

оттиски 9295

1980

Кломперс В.

обзор
ссылки
данные

У. Мол. Структ., 1980, 59,
161-176.



(см. №2; III)

NeAr⁺

1980

1 Б889. Хемоионизация в системе метастабильный неон — метастабильный аргон. Neupauer R. H., Yang S. Y. Chemi-ionization in the metastable neon-metastable argon system. «J. Chem. Phys.», 1980, 72, № 11, 6176—6182 (англ.)

Методом погруженных пучков исследованы ассоциативная ионизация в столкновениях метастабильного неона с метастабильным аргонem: $\text{Ne}^+ + \text{Ar}^+ \rightarrow \text{NeAr}^+ +$

хемоионизация

$+e$ (1) и пеннинговская ионизация $\text{Ne}^+ + \text{Ar}^+ \rightarrow \text{Ne}^+ + \text{Ar}^+ + e$ или $\text{Ne}^+ + \text{Ar} + e$ (2). Измерены зависимости относит. сечений р-ций (1) и (2) от относительной энергии реагентов ω при изменении ω от 0,01 до 10 эВ. Из них определены зависимости абс. сечений от ω . При определении сечений учитывался вклад в процессы (1) и (2) р-ций метастабильных атомов с атомами, находящимися в основном состоянии. Установлено, что двум каналам р-ции (2) соответствуют два различных электронных состояния промежут. комплекса. В пределах ошибки измерения распределения продуктов по кинетич. энергиям и сечения образования Ar^+ для р-ций $\text{Ne}^+ + \text{Ar}^+$ и $\text{Ne}^+ + \text{Ar} + e$ совпадают. Сечение ассоциативной

X. 1981. №1

ионизации в системе $\text{Ne}^+ - \text{Ar}^+$ намного меньше
 соответствующей величины для системы $\text{Ne}^+ - \text{Ar}$. Этот факт
 объяснен сильным различием в кривых Пт энергии этих
 систем на малых расстояниях, где доминируют процессы
 ассоциативной ионизации. Установлено, что зависимость
 полного сечения ионизации от ω в системе $\text{Ne}^+ - \text{Ar}^+$
 при $\omega \leq 0,04$ эВ имеет вид $Q \sim W^{-0,37}$, что характерно
 для систем, в к-рых доминируют силы Ван-дер-Ваальса.
 При $\omega = 0,033$ эВ $Q = 36,6 \cdot 10^{-16}$ см².

Е. Николаев

Ne-Ar

1981

4 Д535. Анализ трансляционной полосы смеси Ne—Ar с использованием нового контура линии. Analysis of the translational band measured in Ne—Ar mixtures with a new line-shape profile. Buontempo U., Cunsolo S., Dore P., Maselli P. «Can. J. Phys.», 1981, 59, № 10, 1499—1503 (англ.; рез. фр.)

спектр

Получены спектры ИК-поглощения раствора неона в жидком аргоне с конц-ией $\sim 2\%$ при t -рах 90—160 K в области 20—200 см^{-1} . Поглощение связано с трансляционными переходами, индуцированными взаимодействиями молекул. По эксперим. спектрам рассчитаны спектральные ф-ции, которые являются фурье-образом корреляционных ф-ций дипольного момента. Спектральные ф-ции спадают к нулю при стремлении частоты к нулю, что связано с корреляцией дипольных моментов, индуцированных в последовательных столкновениях; эффект усиливается с увеличением плотности раствора. С использованием аналогии между межмолекулярными силами и индуцированными дипольными моментами построена полуэмпирич. теория контура трансляционного поглощения. Вычисленный контур прекрасно описывает эксперим. данные. Библ. 21. М. В. Т.

Ф. 1982, 18, № 4.

NeAz

Radzio-Andzelm E. 1981

Chem. Phys. Lett., 1981,

84, N1, 64-67.

радио
химия.
Кривых

(сер. Me Az ; III)

NeAr

off. 145627

1982

97: 115630a An accurate neon-argon interatomic potential. Candori, R.; Pirani, F.; Vecchiocattivi, F. (Dip. Chim., Univ. Perugia, 06100 Perugia, Italy). *Chem. Phys. Lett.* 1982, 90(3), 202-6 (Eng). A combined anal. was made of exptl. data on the Ne-Ar system yielding an accurate interat. potential. For this multi-property anal., a modified version of the Dunham expansion was used as a potential model.

nom. H₂.
qp - ucl

C.A. 1982, 97, N14

Ne-Ar

058.14567

1982

23 Б96. Точный межатомный потенциал Ne—Ar.
Candori R., Pirani F., Vecchiocattivi F. An

accurate Ne—Ar interatomic potential. «Chem. Phys. Lett.», 1982, 90, № 3, 202—206 (англ.)

По совокупности эксперим. данных с привлечением результатов квантовомех. расчетов построен Пт взаимодействия Ne—Ar. Для аналитич. представления выбрана ф-ция Саймонса — Парра — Финланда, переходящая в асимптотич. области в ф-цию $C_6R^{-6} + C_8R^{-8} + C_{10}R^{-10}$. Для коэф. дальнегодействующего взаимодействия C_6 , C_8 , C_{10} использованы теор. значения. Построенная потенциальная ф-ция хорошо воспроизводит эксперим. результаты по вязкости и коэф. диффузии газовой смеси Ne—Ar.

А. В. Немухин

точный
межатомный
потенциал

X. 1982, 19, N 23.

Ar-Ne

[Umnick 13854]

1982

Gunde R., Felder P.,
et al.

потенциал
картеого
взаимоод.,
расчет.

Chem. Phys., 1982, 64,
N 3, 313-332.



NeAr

14251

1982

22 Б1216. Фотоионизация димеров неон — атом инертного газа NeAr, NeKr и NeXe. Pratt S. T., Dehmer P. M., Photoionization of the neon-rare gas dimers NeAr, NeKr, and NeXe. «J. Chem. Phys.», 1982, 76, № 7, 3433—3439 (англ.)

Относительные сечения фотоионизации, несимм. димеров атом неона — атом инертного газа NeAr, NeKr и NeXe измерены в газодинамич. пучке с разрешением (по длине волны) 0,15 А для NeAr и 0,28 А для NeKr и NeXe в диапазоне энергий от молек. порога ионизации до атомного ионизаци. предела тяжелого инертного атома $2P^{0}_{1/2}$. Путем комбинации измеренных Пт ионизации димеров с атомными Пт ионизации и существующими данными по энергиям диссоциации димеров инертных газов (4,45; 4,80 и 4,85 мэВ соотв. для NeAr, NeKr и NeXe) определены энергии диссоциации ионов димеров в основном состоянии $2\Sigma^{+}_{1/2}$ (79 ± 4 ; 55 ± 3 и 41 ± 3 мэВ соотв. для NeAr, NeKr и NeXe). Вклад процессов ассоциативной ионизации при столкновении Ne с возбуж-

у,

75

X. 1982, 19, N 22

На 28.

денным атомом инертного газа исследовался с помощью замены газодинамич. пучка на эффузионный. Структура молек. спектра, подобная структуре атомного спектра в области автоионизац. резонансов Ботлера — Фано, классифицировалась по сериям ридберговских состояний, сходящимся к состоянию $^2P_{1/2}$ иона димера. Вертикальные энергии связи отдельных ридберговских состояний определялись в предположении, что последние коррелируют с основным состоянием $Ne(1s_0)$ и возбужденными состояниями тяжелых атомов инертных газов $ns[1/2]^0_1$ или $nd'[3/2]^0_1$. Вертикальная энергия связи для состояния $^2P_{1/2}$ молек. иона определялась по предельным значениям для ридберговских серий (22 ± 2 ; 18 ± 4 и 14 ± 2 мэВ для NeAr, NeKr и NeXe соответственно). А. И. Маергойз

Kr Ne, Ne Xe (g)

NeAr⁺ (D₀)

(Пр)
на

KrNe⁺, NeXe⁺ (D₀)

NeAr (g)

[exp. 14231]

1982

NeAr⁺ (D₀)

11 Д297. Фотодиссоциация димеров NeAr, NeKr, NeXe. Photoionization of the neon-rare gas dimers NeAr, NeKr, and NeXe. Pratt S. T., Dehmer P. M. «J. Chem. Phys.», 1982, 76, № 7, 3433—3439 (англ.)

В спектральном интервале 778—1030 Å с разрешением 0,15—0,28 Å измерены относит. сечения фотонионизации димеров NeAr, NeKr и NeXe. Определены потенциалы ионизации этих димеров, равные соответственно $15,685 \pm 0,004$; $13,95 \pm 0,003$ и $12,094 \pm 0,004$ эВ, а также энергии диссоциации их ионов в основном состоянии $A^2\Sigma_{1/2}^+$, равные $0,079 \pm 0,004$; $0,055 \pm 0,003$ и $0,041 \pm 0,004$ эВ. Найдены также энергии некоторых ридберговских состояний ионов-димеров. Б. Ф. Гордиец

(+5)

NeKr (g), NeXe (g),

op. 1982, 18, 11



NeAr⁺ (D₀), NeKr⁺, NeXe⁺ (D₀)

(NeAr)₂

100, 14231

1982

(g)

96: 190113s Photoionization of the neon-rare gas dimers neon-argon (NeAr), neon-krypton (NeKr), and neon-xenon (NeXe). Pratt, S. T.; Dehmer, P. M. (Argonne Natl. Lab., Argonne, IL 60439 USA). *J. Chem. Phys.* 1982, 76(7), 3433-9 (Eng). The relative photoionization cross sections for the heteronuclear neon-rare gas dimer NeAr, NeKr, and NeXe were measured at a wavelength resoln. of 0.15 Å for NeAr and 0.28 Å for NeKr and NeXe in the energy region between the mol. ionization threshold and the at. $^2P_{1/2}^0$ ionization limit of the heavier rare gas atom. The dimer ionization potentials are 15.685 ± 0.004 eV for NeAr, 13.950 ± 0.003 eV for NeKr, and 12.094 ± 0.004 eV for NeXe. Combining these values with the known values of the at. ionization potentials and the neutral ground state dissocn. energies yields values of the $A \ ^2\Sigma_{1/2}^+$ ionic ground state dissocn. energies of 0.079 ± 0.004 eV for NeKr, and 0.041 ± 0.004 eV for NeXe. Mol. Rydberg structure, which shows strong similarities to the at. structure in the region of the autoionizing Beutler-Fano resonances, was partially analyzed in terms of Rydberg series converging to the $B \ ^2\Pi_{1/2}$ state of the dimer ion. Vertical binding energies for the individual Rydberg

ⓧ
(+2)
C.A. 1982, 96, ~22 (NeKr)₂, (NeXe)₂

states were detd. based on the assumption that the Rydberg states dissociate to a neon atom in the 1S_0 ground state plus a rare gas atom in an $ns'[1/2]^0$ or $nd'[3/2]_1^0$ excited state. Values of the vertical binding energies of the $B\ ^2\Pi_{1/2}$ ionic state were detd. from the series limits and are 0.022 ± 0.002 eV for NeAr, 0.018 ± 0.004 eV for NeKr, and 0.014 ± 0.002 eV for NeXe.

$(NeAr)_2$

1982

21 Б142. Фотоионизация димеров неон — инертный газ в области резонансных 3s-переходов неона: исследование полуреакций ассоциативной ионизации. Pratt S. T., Dehmer P. M. Photoionization of the neon-rare gas dimers near the neon 3s resonance transitions: a study of associative ionization half-reactions. «J. Chem. Phys.», 1982, 76, № 10, 4865—4871. (англ.)

потенц.
кривые

Измерены относит. сечения фотоионизации димеров NeX ($X=Ar, Kr$ и He) в области энергий резонансных 3s- и 3s'-переходов в Ne^* . В молек. спектрах обнаружена узкая полоса на месте атомного 3s'-перехода и широкая полоса, сдвинутая в область больших энергий. Аналогичная, но менее интенсивная полоса, обнаружена в коротковолновой области относительно атомного 3s-перехода в $NeAr$. Никаких молек. полос не обнаружено в области энергий дипольно запрещенных перехо-

⊗

(42)

X. 1982, 19, N21 $(NeKr)_2$, $(NeHe)_2$

дов в атоме Ne. Потенциальные кривые, полученные из экспериментов по рассеянию атомов Ne^* в метастабильных состояниях на атомах X, использованы для расчетов энергетич. зависимости сечений ионизации. Широкая молек. полоса, сдвинутая относительно $3s'$ -перехода,

обусловлена возбуждением отталкивательного барьера в NeX , после чего следует быстрая автоионизация, приводящая к образованию NeX^+ по аналогии с р-цией ассоциативной ионизации $Ne^* + X \rightarrow NeX^+ + e$. С использованием потенциальных кривых возбужденных состояний NeX вычислены также относит. сечения поглощения для переходов в связанные молек. состояния.

И. А. Тополь



NeAr

1982

11 Д298. Фотоионизация имеров типа атом неона — атом инертного газа около 3s-резонансного перехода неона. Изучение ассоциативной ионизации полуреакций. Photoionization of the neon—rare gas dimers near the neon 3s resonance transitions. A study of associative ionization half-reactions. Pratt S. T., Dehmer P. M. «J. Chem. Phys.», 1982, 76, № 10, 4865—4871 (англ.)

Представлены результаты изучения фотоионизационных сечений димеров типа NeA (A — Ar, Kr, Xe) в районе 730—750 Å. Полученные спектры имеют бимодальную структуру вблизи $3s[1/2]_1^0$ -резонансного перехода Ne*, отнесенную авторами к переходу в синглетные молекулярные состояния, диссоциирующие на $Ne^*(3s'[1/2]_1^0) + A(^1S_c)$. При такой интерпретации пик, сдвинутый в красную область относительно резонансного $3s'[1/2]_1^0$ -перехода, обусловлен автоионизацией связанных колебательных уровней эксимеров, широкий пик, сдвинутый в голубую область — автоионизацией

Do,

18
(+2)

op. 1982, 18, n 11

континуальных колебательных уровней. В рамках предложенной модели рассчитаны относит. сечения фотоионизации и полученный результат находится в хорошем согласии с экспериментом. Авторы получали энергии диссоциации возбужденных состояний: $D_c(\text{NeAr}^*) = 11,5 \pm 2,3$ мэВ, $D_0(\text{NeKr}^*) = 15,2 \pm 2,3$ мэВ, $D_0(\text{NeXe}^*) = 19,4 \pm 2,3$ мэВ, которые оказались на 6—7 мэВ больше полученных в экспериментах по рассеянию.

В. А. Куликов

Ne-Ar

45.14015

1982

97: 12124j Interaction second virial coefficients for neon-argon mixtures at low temperatures. Shamma, Omar; Rigby, Maurice (Chem. Dep., Queen Elizabeth Coll., London, UK W8 7AH). *J. Chem. Soc., Faraday Trans. 2* 1982, 78(4), 689-94 (Eng). The interaction 2nd viral coeff. for Ne-Ar mixts. at 84-138 K were calcd. from the vapor-liq. equil. data of W. B. Streett (1965) and N. S. Trappeniers and J. S. Schouten (1974). The results correlated well with reported values at higher temps. The complete set of results is self-consistent and compatible with predictions of an intermol. potential function based on a variety of other types of exptl. data.

2016
2-виреа
котопиу.

C.A. 1982, 97, N2.

Ne Ar

1982

Thomas G. F., Meath

W. J.

Mol. Phys., 1982,
46, N4, 743-755.

расчет
многоэлектрон.
систем.
спектров.

(сер. He Xe; III)

Ne-Ar

1983

3 Б4044. Точные межатомные потенциалы для систем Ne — более тяжелый инертный газ. Accurate Ne — heavier rare gas interatomic potentials. Candori R., Pirani F., Vecchiocattivi F. «Mol. Phys.», 1983, 49, № 3, 551—560 (англ.)

Метод одновременного моделирования дифференциальных и интегральных сечений в области энергий столкновения, соотв-щих радужному рассеянию, а также 2-х вириальных коэф. для газовых смесей используется для определения параметров модифицированного дунгамовского разл. вблизи минимума ван-дер-ваальсовых Пт межатомного взаимодействия в системах Ne—Ar, Kr, Xe. Дифференциальные сечения рассчитывались для средн. энергий столкновения по квазиклассич. фазовым сдвигам. В расчетах вторых вириальных коэф. по Хиршфельдеру учитывались квантовые поправки. Полученные потенциальные кривые рекомендованы для использования в диапазонах межатомных расстояний 2,7—6,5; 2,9—7,0; 3,0—7,5 Å для систем Ne—Ar, Ne—Kr, Ne—Xe соответственно.

А. И. Маергойз

потенц.
кривые



X. 1984, 19, 43

NeAr

10m. 174321

1983

Dehmer P. M.,

Руберг.
состоят,
Do

Comments Atom. and
Mol. Phys., 1983, 13, N5,
205-227.



NeAr

1983

Thomas G.F., Meath
W.J.

Mol. Phys., 1983, 48,
N3, 649-650.

( cr. HeXe; III)

NeAr₂(2)

[Om. 19896]

1984

Azziz R.A., Van Galen A.,

J. Chem. Phys., 1984,

81, N 2, 779 - 787.

u.n.

Ne Ar

1984

Muxley Philip,
Knowles David B., et al.

Роман-
цуклы
основ.
состав.

J. Chem. Soc. Faraday
Trans., 1984, Pt 2, 80,
N 11, 1349-1361.

(Сел. He₂; III)

NeAr

1984

Yoshino K.

спектр,
и. п.

Тунко кэнкю, Бунко
кенкю, г. Spectroscop.
Soc. Jap., 1984, 33, N 3,
157-166.

●
(св. Ar₂; III)

Ne⁺-Ar

[Om. 22 241]

1985

Hausmann R., Morgner H.

потенц.
кривая,
теор.
расчет

Mol Phys., 1985, 54, N5,
1085-1099.

NeAr

1985

10 Д258. Зависимость от скорости сечений пеннинговской и ассоциативной ионизации атомов аргона метастабильными атомами неона. Velocity dependence of the cross section for Penning and associative ionization of argon atoms by metastable neon atoms. Aguilar-Navarro A., Brunetti B., Rosi S., Vecchiocattivi F., Volpi G. G. «J. Chem. Phys.», 1985, 82, № 2, 773—779 (англ.)

В скрещенных пучках при термич. энергиях измерены зависимости от энергии столкновений E относит. сечений (σ) процессов $\text{Ne}^*(^3P_2, ^3P_0) + \text{Ar} \rightarrow \text{Ne} + \text{Ar}^+ + e^-$ (σ_P) или $\rightarrow \text{NeAr}^+ + e^-$ (σ_A). Охвачена область $E = 0,02 - 0,35$ эВ. Измеренная зависимость полного сечения $\sigma_P + \sigma_A$ от E согласуется с известными данными. Калибровкой результата при $E = 0,056$ эВ. по прежнему абс. измерению найдено абс. сечение, которое в интервале от 0,01 до 1 эВ спадает со слабой немонотонностью от 18 до 12 $\text{\AA}^2$. Измеренное отношение $q = \sigma_A / \sigma_P$ круто

ф. 1985, 18, N 10

спадает от 0,5 при $E=0,02$ эВ до 0,02 при $E=0,3$ эВ в согласии с прежними измерениями. Анализ q позволяет оценить взаимодействие $V_+(R)$ системы $\text{Ne}-\text{Ag}^+$ в интервале 2,2—4 Å. Найдено, что $V_+(R)$ имеет минимум при $R=2,5$ Å с энергией 0,08 эВ, что близко к ранее найденной эксперим. энергии диссоциации основного $^2\Sigma_{1/2}$ -состояния иона NeAg^+ . Т. обр. процесс ионизации идет главным образом через основное состояние. Исследовано возможное влияние анизотропии взаимодействия на процессы ионизации.

А. И. Р.

$Ar^+ - Ne$

DM. 22241

1985

Maisamann D., Morgner H.,

Mol. Phys., 1985, 54, N5,
1085-1099.

потенц.
кривая,
теор.
расчет.

NeAr⁺ (om. 24105) 1986

Brunetti B., Vecchiocattivi F.,
Aguilar-Navarro A, et al.,

критич.
попытки
реценз.
Chem. Phys. Lett., 1986,
126, N 3-4, 245-250.

(см. HeBr⁺, III)

NeAr

1986

' 105: 12496r The neon-argon interatomic potential. Candori, Roberto; Pirani, Fernando; Vecchiocattivi, Franco (Dip. Chim., Univ. Perugia, 06100 Perugia, Italy). *J. Chem. Phys.* 1986, 84(9), 4833-7 (Eng). In relation to existing new, accurate exptl. results, the Ne-Ar interat. potential was reexamd. The two multiproperty potentials available in the literature were tested in their ability to reproduce all the exptl. data available. A new potential was detd., which allowed a very good description of all the available exptl. results, i.e., transport properties, second virial coeffs., and differential and integral cross sections for scattering in the thermal energy range, the new potential does not exhibit the inadequacies of the earlier multiproperty potentials.

(multiproperty
potential)

C.A. 1986, 105, N2

Ne Ar

[Om. 23738]

1986

Elkind J. L., Armentro-
ut P. B.,

nomeris.
p-ue

J. Chem. Phys., 1986,
84, N 9, 4862-4871.

Ne Ar

(Om. 32063)

1988

/ 110: 160667r The neon-argon potential revisited. Barrow, David A.; Aziz, Ronald A. (Dep. Phys., Univ. Waterloo, Waterloo, ON Can. N2L 3G1). *J. Chem. Phys.* 1988, 89(10), 6189-94 (Eng). The neon-argon interaction was reexamd. in the light of the new data, both theor. and exptl. Two recent potentials were analyzed as to their ability to predict both macro- and microscopic properties. Both of these failed to give a complete description of the interaction. A new simple potential is presented, which accurately predicts a wide range of properties, including high- and low-energy total cross sections, differential cross section, as well as second virials, viscosity, and diffusion. New combining rules were tested, and found to be consistent with the new potential.

no memos.
qp-uc

C.A. 1989, 110, ~18

Ne-Ar

1988

Kerstel E. R. T.,
Janssens M. F. M., et al.

nomeris. Chem. Phys. 1988,
p-ur 119, (2-3), 325-41.

(cur. ● Ne-O₂; III).

Ne Ar.

(DM. 30 003) 1988

Krauss M., Regan R.M.
et al.

теорет.
расчет
теор.
взаимог.

J. Phys. Chem., 1988,
92, N 15, 4329-4333.

NeAr

1988

110: 121765b Theoretical studies on the ionization potentials of interacting atoms at large separations. Mizukami, Yoshihiro; Hall, George G. (Div. Mol. Eng., Kyoto Univ., Kyoto, Japan 606). *Theor. Chim. Acta* 1988, 74(6), 463-78 (Eng). The theory of the one-particle Green function is applied to calcs. of the ionization potentials of interacting atoms that are at large sepns. The equations for the ionization potential involve terms, which relate to the van der Waals interactions between the sep'd. atoms, and to long-range interactions between an atom and an ion. Numerical calcs. of the ionization potentials of two H atoms and of two He atoms at large sepns. are performed. Applications to the ionization potentials of weakly-interacting van der Waals mols. (NeAr, NeKr, NeXe) are also reported.

I, meopen-
pacem

(+2) $\otimes$

C.A. 1989, 110, N/4

Ar Ne⁺

1989

Frenking Gernot,
Koch Wolfram et al.

J. Phys. Chem. 1989,
93 (9), 3410-18.

(cor. NeLi⁺; III)

Ar^*, Ne

1989

Kucal M., Hennecart
D. et al.

по теме.
Кривая

Z. Phys. D: At., Mol.
Clusters 1989, 13 (3),
241-54.

(see Ar^*, He ; III)

ArNe⁶⁺ Wong, Ming Wah,
Radom, Leo, 1990

Racrem M.N., J. Phys. Chem., 1990,
homenu. 94(2), 638-44.
krubce

Isoelectronic analogs of phos-
phorus ● nitride:

C.A. 1990, 112, N8, 62958h.

remarkably multiply charged
cations.

HeAr

(OM. 35862a")

1991

Keil M., Danielson L. J.,

J. Chem. Phys. 1991,

94, N1, 296-309

On obtaining ● interatomic
potentials from multi-

property fits to experimen-
tal data.

NeAr²⁺

1993

118: 132465v Formation and mean lifetime of the metastable doubly charged rare gas dimer neon-argon (NeAr²⁺). Ben-Itzhak, I.; Gertner, I.; Rosner, B. (Dep. Phys., Kansas State Univ., Manhattan, KS 66506 USA). *Phys. Rev. A* 1993, 47(1), 289-94 (Eng). The observation of a long-lived NeAr²⁺ mol. ion is reported. This ion was obtained by charge stripping of a 900-keV NeAr⁺ beam in an Ar gas target; its mean lifetime was detd. to be 275 ± 25 nsec. This was a direct measurement of the mean lifetime of a doubly charged rare gas dimer. The ion decay was described well by a single exponential decay, suggesting that only one metastable state was populated in the collision. The cross section for the NeAr²⁺ prodn. was detd. to be $(3 \pm 2) \times 10^{-15}$ cm². The existence of this weakly bound mol. ion and the fact that its mean lifetime is known can serve to motivate better theor. calcns. of mol. structure and the disocn. process.

(1)

C.A. 1993, 118, N14

NeAr²⁺

1993

1 118: 154977r The electronic ground state of the neon-argon ion(2+) (NeAr²⁺). A complete-active-space SCF/multireference-CI study. Koch, Wolfram; Frenking, Gernot; Gobbi, Alberto (Inst. Org. Chem., Tech. Univ. Berlin, Str. des 17. Juni 135, W-1000 Berlin, 12 Germany). *Chem. Phys. Lett.* 1993, 203(2-3), 205-10 (Eng). The lowest-lying electronic state of NeAr²⁺, X¹Σ⁺, was studied by using accurate ab-initio calcns. of the CAS-SCF/MR-CI type with large one-electron basis sets. A rather deep local min. was found in the potential-energy curve, with a barrier of 0.51 eV preventing spontaneous dissocn. into the Ne-(³P) + Ar-(³P) sepd. atom limit, which is 4.46 eV more stable than the metastable NeAr²⁺. Thus, the recently exptl. obsd. NeAr²⁺ is most probably the ground state ion. This is in sharp contrast to Ne²⁺, which is also exptl. known, but, since its X¹Σ⁺ electronic ground state potential is purely repulsive, must be in a long-lived excited state.

OCH. COCM.,
X¹Σ⁺, meop.
pauem

C.A. 1993, 118, v16

NeAr⁺

1995

López G. E.

et. n., J. Comput. Chem.

Do

1995. 16, N 6. C. 758-

767

(cur.  He He⁺; III)

Ne Ar₂⁺

1996

124: 355242v Emission spectrum of NeAr₂⁺ cluster ion produced in the flowing afterglow. Tsuji, Masaharu; Tanaka, Makoto; Nakamura, Masafumi; Nishimura, Yukio (Inst. Adv. Mater. Study, Kyushu Univ., Kasuga, Japan 816). *Chem. Lett.* 1996, (5), 367-368 (Eng). NeAr⁺ emission systems resulting from the three-body Ne⁺/2Ar and Ne⁺/Ar/He reactions were obsd. in the He flowing afterglow. At high Ar stagnation pressures ≥ 1 atm, a new broad band appeared in the 210-275 nm region. It was ascribed to the bound-free C₂-X, B-X, C₁-A₁, C₂-A₂, and B-A₂ transitions of the NeAr₂⁺ cluster ion.

(спектр
испускания)

C. A. 1996, 124, N26

Ar⁺-Ne

1998

Glushkov, A.V. et al.

сверхпох.

Russ. Phys. J.
1998, 41(3), 223-226

Van der Waals.
cu cmen

(cu.



Ne⁺; III)

F: Ne-Ar

P: 3

132:69577 Ground state potential energy curves for He₂, Ne₂, Ar₂, He-Ne, Ar, and Ne-Ar: A coupled-cluster study. Cybulski, Slawomir M.; Toczyłowski Rafal R. Department of Chemistry and Biochemistry, Miami University Oxford OH 45056, USA J. Chem. Phys., 111(23), 10520-10528 (English) 1999 Potential energy curves for three homonuclear (He₂, Ne₂, Ar₂) and three heteronuclear (HeNe, HeAr, NeAr) rare gas dimers are presented. The curve calculated using several correlation-consistent basis sets and the supermol. and double excitation coupled-cluster theory with noniterative perturbative treatment of triple excitations, CCSD(T). The most accurate results

C.A. 2000, 132

were obtained with the aug-cc-pV5Z basis set supplemented with an addnl. (3s3p set of bond functions. The results obtained with a smaller aug-cc- pVQZ+(3s3p2d2f1g) basis set are almost as accurate. Both basis sets give results in better agreement with potentials based on expts. than the rece results obtained with larger d-aug-cc-pV6Z and t-aug-cc-pV6Z basis sets b without bond functions.

For each complex and each basis set a fitted pot energy curve is given. In addn., for each complex, with the exception of the values of Re, De, B0, D0, and .ltbbrac.R.rtbbrac.0 are given. For He bound states were found so only the values of Re and De are presented. F Ar2, and Ne-Ar the calcd. frequencies of vibrational and pure rotational transitions are shown to be in good agreement with the exptl. results.

NeAr

1999

Perez-Jorda, Jose M; et al.

Ue, Le, De,
neof-pacut

J. Chem. Phys. 1999,
110(4), 1916 - 1920

(all. He₂; ● III)

F: Ne-Ar

P: 3

1999

132:69577 Ground state potential energy curves for He₂, Ne₂, Ar₂, He-Ne, He-Ar, and Ne-Ar: A coupled-cluster study. Cybulski, Slawomir M.; Toczyłowski, Rafal R. Department of Chemistry and Biochemistry, Miami University Oxford, OH

45056, USA J. Chem. Phys., 111(23), 10520-10528 (English) 1999 Potential energy curves for three homonuclear (He₂, Ne₂, Ar₂) and three heteronuclear (HeNe, HeAr, NeAr) rare gas dimers are presented. The curves were calcd. using several correlation-consistent basis sets and the supermol. single and double excitation coupled-cluster theory with noniterative perturbational treatment of triple excitations, CCSD(T). The most accurate results were obtained with the aug-cc-pV5Z basis set supplemented

C.A. 2000, 132

with an addnl. (3s3p2d2f1g) set of bond functions. The results obtained with a smaller aug-cc-pVQZ+(3s3p2d2f1g) basis set are almost as accurate. Both basis sets give results in better agreement with potentials based on expts. than the recent results obtained with larger d-aug-cc-pV6Z and t-aug-cc-pV6Z basis sets but without bond functions. For each complex and each basis set a fitted potential energy curve is given. In addn., for each complex, with the exception of He₂, the values of Re, De, B0, D0, and $\frac{1}{2}B_0$ are given. For He₂ no bound states were found so only the values of Re and De are presented. For Ne₂, Ar₂, and Ne-Ar the calcd. frequencies of vibrational and pure rotational transitions are shown to be in good agreement with the exptl. results.

F: NeArHCl

P: 3

1999

130:258839 Spectroscopic study of the mixed rare-gas-molecule van der Waas trimer NeArHCl.

Xu, Yunjie; Armstrong, Geoffrey S.; Jager, Wolfgang (Department of Chemistry, University of Alberta, Edmonton, AB T6G 2G2, Ca J. Chem. Phys., 110(9), 4354-4362 (English) 1999\ The van der Waals trimer NeArHCl was studied with a pulsed mol. beam Fourier transform microwave spectrometer. The trimer is rare-gas-rare-gas linear mol. that is relatively unexplored and is of considerable importance to the understanding of new correction terms proposed in current studies of nonadditive contributions in weakly bound mol.

systems. Pure rotational of 4 isotopomers of NeArHCl, i.e., $^{20}\text{NeArH } ^{35}\text{Cl}$, $^{20}\text{NeArH } ^{37}\text{Cl}$, $^{22}\text{NeArH } ^{35}\text{Cl}$, $^{20}\text{NeArD } ^{35}\text{Cl}$ were studied. Nuclear quadrupole hyperfine structures due to ^{35}Cl , ^{37}Cl , and D nuclei were obsd. and assigned. The resulting nuclear quadrupole coupling consts. were used to provide information about the anisotropy of the NeArHCl potential energy surface. Structural parameter the trimer were detd. from the rotational consts. obtained. A pseudotriatomic harmonic force field anal. was performed to provide qual. frequency pred. of the heavy atom van der Waals vibrational motions. Information about the additive and nonadditive interactions from structural and force field anal. is discussed.